

§ 50. Прохождение через потенциальный барьер

Рассмотрим движение частицы в поле типа, изображенного на рис. 13, характеризующегося наличием *потенциального барьера*, — участка, в котором потенциальная энергия $U(x)$ превышает полную энергию E частицы. В классической механике потенциальный барьер непроницаем для частицы; в квантовой же механике частица может, с отличной от нуля вероятностью, пройти «сквозь барьер» (об этом явлении говорят также, как о *туннельном эффекте*)¹⁾. Если поле $U(x)$ удовлетворяет условиям квазиклассичности, то коэффициент прохождения через барьер может быть вычислен в общем виде. Заметим, что эти условия приводят, в частности, к тому, что барьер должен быть широким и потому коэффициент прохождения в квазиклассическом случае мал.

Чтобы не прерывать дальнейших вычислений, решим предварительно следующую задачу. Пусть квазиклассическая волновая функция в области справа от точки поворота $x=b$ (где $U(x) < E$) имеет вид бегущей волны:

$$\psi = \frac{C}{\sqrt{p}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p \, dx + \frac{i\pi}{4} \right). \quad (50,1)$$

Требуется найти волновую функцию этого же состояния в области

$x < b$. Сделаем это тем же способом обхода в плоскости комплексного x , который был применен в § 47.

Положив

$$E - U(x) \approx F_0(x - b), \quad F_0 > 0,$$

напишем функцию (50,1) в виде

$$\psi(x) = \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{(x-b)^{1/4}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mF_0} \int_b^x \sqrt{x-b} \, dx + \frac{i\pi}{4} \right\}$$

и произведем в ней обход справа налево по полуокружности в верхней полуплоскости:

$$x - b = \rho e^{i\varphi}, \quad i \int_b^x \sqrt{x-b} \, dx = \frac{2}{3} \rho^{3/2} \left(-\sin \frac{3\varphi}{2} + i \cos \frac{3\varphi}{2} \right),$$

¹⁾ Примеры такого рода уже рассматривались в задачах 2 и 4 к § 25.

причем фаза φ меняется от 0 до π . В течение обхода функция $\psi(x)$ сначала убывает, а затем возрастает по модулю, становясь в конце обхода равной

$$\psi(x) = \frac{C}{(2mF_0)^{1/4}} \frac{1}{(b-x)^{1/4} e^{i\pi/4}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^b \sqrt{2mF_0(b-x)} dx + \frac{i\pi}{4} \right\}.$$

Таким образом, находим следующее правило соответствия ¹⁾:

$$\frac{C}{\sqrt{p}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx + \frac{i\pi}{4} \right\} \rightarrow \frac{C}{\sqrt{|p|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \left| \int_b^x p dx \right| \right\}. \quad (50,2)$$

$x > b$ $x < b$

Подчеркнем, что это правило предполагает определенный вид волновой функции (бегущая направо волна) в классически разрешенной области и должно применяться именно для перехода от последней к классически недоступной области.

Вернемся теперь к вычислению коэффициента прохождения через потенциальный барьер. Пусть частица падает на барьер из области I слева направо. Тогда в области III позади барьера будет иметься лишь прошедшая через барьер волна, распространяющаяся вправо; волновую функцию в этой области напомним в виде

$$\psi = \sqrt{\frac{D}{v}} \exp \left(\frac{i}{\hbar} \int_b^x p dx + \frac{i\pi}{4} \right), \quad (50,3)$$

где $v = p/m$ — скорость частиц, а D — плотность потока в волне. По правилу (50,2) находим теперь волновую функцию в области II внутри барьера:

$$\begin{aligned} \psi &= \sqrt{\frac{D}{|v|}} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_x^b p dx \right| \right) = \\ &= \sqrt{\frac{D}{|v|}} \exp \left(\frac{1}{\hbar} \left| \int_a^b p dx \right| - \frac{1}{\hbar} \left| \int_a^x p dx \right| \right). \end{aligned} \quad (50,4)$$

¹⁾ При обходе же справа налево через нижнюю полуплоскость функция $\psi(x)$ сначала возрастает, а затем убывает по модулю, превращаясь на левой полуоси ($\varphi \rightarrow -\pi$) в экспоненциально малую величину, сохранение которой «на фоне» экспоненциально большой функции (50,2) было бы незаконным. На том участке обхода, где $\psi(x)$ экспоненциально велико, из-за неточности квазиклассического приближения теряется экспоненциально малая добавка, которая при $\varphi \rightarrow -\pi$ могла бы превратиться в экспоненциально большой член, тем самым тоже теряющийся.

Наконец, применив правило (47,5), получим в области I перед барьером:

$$\psi = 2 \sqrt{\frac{D}{v}} \exp\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right) \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_x^a p dx - \frac{\pi}{4}\right).$$

Эта функция, если положить в ней

$$D = \exp\left(-\frac{2}{\hbar} \int_a^b |p| dx\right), \quad (50,5)$$

принимает вид

$$\begin{aligned} \psi &= \frac{2}{\sqrt{v}} \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_a^x p dx + \frac{\pi}{4}\right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{v}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx + \frac{i\pi}{4}\right) + \frac{1}{\sqrt{v}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_a^x p dx - \frac{i\pi}{4}\right). \end{aligned}$$

Первый член в ней (сводящийся при $x \rightarrow -\infty$ к плоской волне $\psi \sim e^{ipx/\hbar}$) описывает падающую на барьер волну, а второй — отраженную волну. Выбранная нормировка отвечает равной единице плотности потока в падающей волне, а потому величина D — плотность потока в прошедшей волне — совпадает с искомым коэффициентом прохождения через барьер. Подчеркнем, что эта формула применима лишь, если показатель экспоненты велик, так что само D мало¹⁾.

До сих пор предполагалось, что поле $U(x)$ удовлетворяет условию квазиклассичности на всем протяжении барьера (за исключением только непосредственной окрестности точек поворота). Фактически же часто приходится иметь дело с барьерами, в которых кривая потенциальной энергии с одной из сторон идет настолько круто, что квазиклассическое приближение неприменимо. Основной экспоненциальный множитель в D остается здесь тем же, что и в формуле (50,5), но предэкспоненциальный множитель (равный в (50,5) единице) меняется. Для его вычисления необходимо в принципе вычислить точную волновую функцию в неквазиклассической области и по соответствию с ней определить квазиклассическую волновую функцию внутри барьера.

¹⁾ С экспоненциальной малостью D связан и тот факт, что амплитуды падающей и отраженной волн в области I оказались одинаковыми; экспоненциально малая разница между ними в квазиклассическом приближении теряется.

Задачи

1. Определить коэффициент прохождения через потенциальный барьер, изображенный на рис. 14: $U(x) = 0$ при $x < 0$, $U(x) = U_0 - Fx$ при $x > 0$; вычислить только экспоненциальный множитель.

Решение. Простое вычисление приводит к результату

$$D \sim \exp \left[-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar F} (U_0 - E)^{3/2} \right].$$

2. Определить вероятность выхода частицы (с равным нулю моментом) из центрально-симметричной потенциальной ямы: $U(r) = -U_0$ при $r < r_0$, $U(r) = \alpha/r$ при $r > r_0$ (рис. 15)¹⁾.

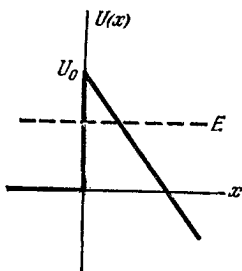


Рис. 14

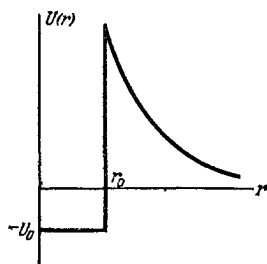


Рис. 15

Решение. Центрально-симметричная задача сводится к одномерной, так что можно применять полученные выше формулы. Имеем

$$\omega \sim \exp \left[-\frac{2}{\hbar} \int_{r_0}^{\alpha/E} \sqrt{2m \left(\frac{\alpha}{r} - E \right)} dr \right].$$

Вычисляя интеграл, окончательно получим

$$\omega \sim \exp \left\{ -\frac{2\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \left[\arccos \sqrt{\frac{Er_0}{\alpha}} - \sqrt{\frac{Er_0}{\alpha} \left(1 - \frac{Er_0}{\alpha} \right)} \right] \right\}.$$

В предельном случае $r_0 \rightarrow 0$ эта формула переходит в формулу

$$\omega \sim \exp \left(-\frac{\pi\alpha}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} \right) = \exp \left(-\frac{2\pi\alpha}{\hbar v} \right).$$

Эти формулы применимы, когда показатель велик, т. е. $\alpha/\hbar v \gg 1$. Это условие, как и должно быть, совпадает с условием (49,11) квазиклассичности движения в кулоновом поле.

3. Поле $U(x)$ представляет собой две симметричные потенциальные ямы (I и II, рис. 16), разделенные барьером. Если бы барьер был непроницаем для частицы, то существовали бы уровни энергии, отвечающие движению частицы только в одной или в другой яме, одинаковые для обеих ям. Возможность перехода через барьер приводит к расщеплению каждого из этих уровней на два близких уровня, соответствующих состояниям, в которых частица движется

¹⁾ Эта задача впервые рассматривалась Г. А. Гамовым (1928) и Герни и Кондоном (R. W. Gurney, E. U. Condon, 1929) в связи с теорией радиоактивного α -распада.

одновременно в обеих ямах. Определить величину расщепления (поле $U(x)$ предполагается квазиклассическим).

Решение. Приближенное решение уравнения Шредингера в поле $U(x)$, отвечающее пренебрежению вероятностью перехода через барьер, строим с помощью квазиклассической волновой функции $\psi_0(x)$, описывающей движение (с некоторой энергией E_0) в одной яме (скажем, в яме I), т. е. экспоненциально затухающей в обе стороны от границ этой ямы; функция $\psi_0(x)$ предполагается нормированной так, что интеграл от ψ_0^2 по области ямы I равен единице. При учете малой вероятности туннелирования уровень E_0 расщепляется на уровни E_1 и E_2 . Правильные волновые функции нулевого приближения, отвечающие этим уровням, представляют собой симметричную и антисимметричную комбинации функций $\psi_0(x)$ и $\psi_0(-x)$:

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) + \psi_0(-x)], \quad \psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_0(x) - \psi_0(-x)]. \quad (1)$$

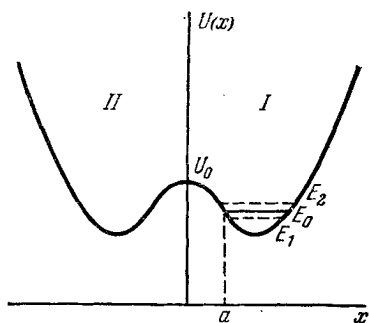


Рис. 16

В области ямы I функция $\psi_0(-x)$ исчезающе мала по сравнению с $\psi_0(x)$, а в яме II — наоборот. Поэтому произведение $\psi_0(x)\psi_0(-x)$ исчезающе мало везде, и функции (1) нормированы так, что равны единице интегралы от их квадратов по ямам I и II.

Пишем уравнения Шредингера

$$\psi_0'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_0 - U) \psi_0 = 0,$$

$$\psi_1'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - U) \psi_1 = 0,$$

умножаем первое на ψ_1 , второе на ψ_0 , вычитаем почленно и интегрируем по dx в пределах от 0 до ∞ . Имея в виду, что при $x = 0$: $\psi_1 = \sqrt{2}\psi_0$, $\psi_1' = 0$ и что

$$\int_0^{\infty} \psi_0 \psi_1 dx \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \int_0^{\infty} \psi_0^2 dx = \frac{1}{\sqrt{2}},$$

находим

$$E_1 - E_0 = -\frac{\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0).$$

Аналогичным образом находим для $E_2 - E_0$ такое же выражение с обратным знаком. Таким образом,

$$E_2 - E_1 = \frac{2\hbar^2}{m} \psi_0(0) \psi_0'(0).$$

С помощью формулы (47,1) с коэффициентом C из (48,3) находим, что

$$\psi_0(0) = \sqrt{\frac{\omega}{2\pi v_0}} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_0^a |p| dx\right), \quad \psi_0'(0) = \frac{mv_0}{\hbar} \psi_0(0),$$

где $v_0 = \sqrt{2(U_0 - E_0)/m}$. Таким образом,

$$E_2 - E_1 = \frac{\omega \hbar}{\pi} \exp\left(-\frac{1}{\hbar} \int_{-a}^a |p| dx\right)$$

(a — точка поворота, отвечающая энергии E_0 — см. рис. 16).

4. Определить точное значение коэффициента прохождения D (не предполагая его малым) через параболический потенциальный барьер $U(x) = -kx^2/2$ (*E. C. Kemble, 1935*)¹⁾.

Решение. При любых значениях k и E движение квазиклассично на достаточно больших расстояниях $|x|$, где

$$p = \sqrt{2m\left(E + \frac{1}{2}kx^2\right)} \approx x\sqrt{mk} + E\sqrt{\frac{m}{k}} \frac{1}{x}$$

и асимптотический вид решения уравнения Шредингера есть

$$\psi = \text{const} \cdot \xi^{\pm i\varepsilon - 1/2} \exp(\pm i\xi^2/2),$$

где введены обозначения:

$$\xi = x \left(\frac{mk}{\hbar^2}\right)^{1/4}, \quad \varepsilon = \frac{E}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}}.$$

Нас интересует решение, которое при $x \rightarrow +\infty$ содержит лишь прошедшую через барьер волну, т. е. распространяющуюся слева направо. Положим

$$\psi = B\xi^{i\varepsilon - 1/2} \exp(i\xi^2/2) \text{ при } x \rightarrow \infty, \quad (1)$$

$$\psi = (-\xi)^{-i\varepsilon - 1/2} \exp(-i\xi^2/2) + A(-\xi)^{i\varepsilon - 1/2} \exp(i\xi^2/2) \text{ при } x \rightarrow -\infty. \quad (2)$$

Первый член в (2) представляет собой падающую, а второй — отраженную волну (направлением распространения волны является то, в котором возрастает ее фаза). Связь между A и B может быть найдена исходя из того, что асимптотическое выражение ψ справедливо во всей достаточно удаленной области плоскости комплексного переменного ξ . Проследим за изменением функции (1) при обходе вдоль полуокружности большого радиуса ρ в верхней полуплоскости ξ :

$$\xi = \rho e^{i\varphi}, \quad i\xi^2 = \rho^2 (-\sin 2\varphi + i \cos 2\varphi),$$

причем φ меняется от 0 до π . В результате обхода функция (1) переходит во второй член в (2) с коэффициентом

$$A = B(e^{i\pi})^{i\varepsilon - 1/2} = -iB e^{-\pi\varepsilon}; \quad (3)$$

на участке пути ($\pi/2 < \varphi < \pi$), где модуль $|\exp(i\xi^2/2)|$ экспоненциально велик, теряется экспоненциально малая величина, которая должна была бы дать первый член в (2)²⁾.

При выбранной в (2) нормировке падающей волны условие сохранения числа частиц имеет вид

$$|A|^2 + |B|^2 = 1. \quad (4)$$

¹⁾ Решение этой задачи можно применить также к прохождению в достаточной близости к вершине любого барьера $U(x)$, квадратично зависящего от x вблизи своего максимума.

²⁾ Обход же через нижнюю полуплоскость для определения A был бы непригоден, так как на участке пути ($-\pi < \varphi < -\pi/2$), примыкающем к его левому краю (где ψ дается формулой (2)), член с $\exp(i\xi^2/2)$ экспоненциально мал по сравнению с членом с $\exp(-i\xi^2/2)$.

Из (3) и (4) находим искомый коэффициент прохождения

$$D = |B|^2 = \frac{1}{1 + e^{-2\pi\epsilon}}.$$

Эта формула справедлива при любых E . Если энергия отрицательна и велика по абсолютной величине, получаем $D \approx e^{-2\pi|\epsilon|}$ в согласии с формулой (50,5). При $E > 0$ величина

$$R = 1 - D = \frac{1}{1 + e^{2\pi\epsilon}}$$

есть коэффициент надбарьерного отражения.

§ 51. Вычисление квазиклассических матричных элементов

Непосредственное вычисление матричных элементов какой-либо физической величины f с помощью квазиклассических волновых функций представляет большие трудности. Мы предполагаем, что энергии состояний, для перехода между которыми вычисляется матричный элемент, не близки друг к другу, так что последний не сводится к компоненте Фурье от величины f (§ 48). Трудности связаны с тем, что в силу экспоненциального (с большой мнимой экспонентой) характера волновых функций, подынтегральное выражение оказывается быстро осциллирующей величиной.

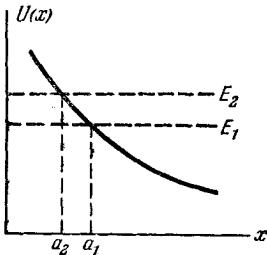


Рис. 17

Будем рассматривать одномерный случай (движение в поле $U(x)$) и предположим для простоты, что оператор физической величины f есть просто функция координаты x . Пусть ψ_1 и ψ_2 — волновые функции, соответствующие некоторым значениям E_1 и E_2 энергии частицы (причем $E_2 > E_1$, рис. 17); будем считать, что ψ_1, ψ_2 выбраны вещественными. Мы должны вычислить интеграл

$$f_{12} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1 f \psi_2 dx. \quad (51,1)$$

Согласно (47,5) волновая функция ψ_1 в областях по обе стороны от точки поворота $x = a_1$ (в достаточном удалении от нее) имеет вид

$$\begin{aligned} \text{при } x < a_1: \psi_1 &= \frac{C_1}{2\sqrt{|\rho_1|}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \left| \int_{a_1}^x \rho_1 dx \right| \right), \\ \text{при } x > a_1: \psi_1 &= \frac{C_1}{\sqrt{\rho_1}} \cos\left(\frac{i}{\hbar} \int_{a_1}^x \rho_1 dx - \frac{\pi}{4}\right) \end{aligned} \quad (51,2)$$

и аналогично для ψ_2 (с заменой индекса 1 индексом 2).